



TITLE:

# 電池材料のラマンスペクトルの計算

AUTHOR(S):

山中, 俊朗

---

CITATION:

山中, 俊朗. 電池材料のラマンスペクトルの計算. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 63-63

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230763>

RIGHT:

電池材料のラマンスペクトルの計算  
Simulation of Raman spectrum of battery materials

京都大学 産官学連携本部

山中 俊朗

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP を利用し、いくつかの電池材料のラマンスペクトルの計算を試みた。

$\text{FePO}_4$  は電子状態がメタリックになり、計算ができなかった。

$\text{LaF}_3$  では図に示すように計算結果が実験結果を非常によく再現した。

それぞれのピークを層内のフッ素の振動、層間のフッ素の振動、ランタンの振動などに同定することができた。この解析により、脱フッ化過程では層間のフッ素が脱離することが推測された。

